ISSN 1226-4881(Print) 2288-5324(Online)

실리콘 박막 트랜지스터 내 포논 평균자유행로 스펙트럼 비등방성 열전도 특성에 대한 수치적 연구

강형선^{*}·고영하^{*}·진재식^{*†} * 조선이공대학교 기계설계과

A Numerical Study on the Anisotropic Thermal Conduction by Phonon Mean Free Path Spectrum of Silicon in Silicon-on-Insulator Transistor

Hyung-sun Kang^{*}, Young Ha Koh^{*} and Jae Sik Jin^{*†} * Dept. of Mechanical Design, Chosun College of Science & Technology

(Received October 26, 2015; Revised December 17, 2015; Accepted December 20, 2015)

Key Words: Boltzmann Transport Equation(볼츠만 수송방정식), Dispersion Relation(분산관계), Phonon Mean Free Path(포논 평균자유행로), Thermal Conductivity(열전도율)

초록: 본 연구의 목적은 실리콘 열전달 조절을 위한 포논의 평균자유행로(Mean free path, MFP) 스펙트럼 열전달 기여도 예측이다. 열전달의 크기 효과는 포논의 MFP 와 재료의 특성길이가 비슷할 때 나타나는 데, 나노시스템 응용을 위한 재료의 열전달 증감을 위해 포논 MFP 스펙트럼에 대한 열전달 기여도 예 측이 중요하다. 이를 위해 포논의 주파수 의존성이 고려된 볼츠만 수송방정식(Boltzmann transport equation) 근간의 full phonon dispersion 모델을 통해 실리콘 박막(Silicon-on-Insulator) 트랜지스터의 실리콘 박막 두께 변화(41-177 nm)에 따른 포논 MFP 스펙트럼 열전달 특성 및 비등방성을 해석함으로써, 본 연 구 결과는 향후 박막 트랜지스터에 대한 고효율 열소산(heat dissipation) 설계전략에 활용될 수 있다.

Abstract: The primary concern of this research is to examine the phonon mean free path (MFP) spectrum contribution to heat conduction. The size effect of materials is determined by phonon MFP, and the size effect appears when the phonon MFP is similar to or less than the characteristic length of materials. Therefore, knowledge of the phonon MFP is essential to increase or decrease the heat conduction of a material for engineering applications, such as micro/nanosystems. In this study, frequency dependence of the phonon transport is considered using the Boltzmann transport equation based on a full phonon dispersion model. Additionally, the phonon MFP spectrums of in-plane and out-ofplane heat transport are investigated by varying the film thickness of the silicon layer from 41 nm to 177 nm. This will increase the understanding of anisotropic heat conduction in a SOI (Silicon-on-Insulator) transistor.

- 기호설명 -	L	: 실리콘 박막
C $H \ominus (I/m^3 K)$	L_c	: 시스템 특성
	$N_{\rm band}$: 전체 포논 벽
D(ω) : 포논의 상태밀도 (l/m²)	q	: 열 유속 (W/
e : 에너지 밀도 (J/m³)	q_{vol}	: 단위부피당
e" : 단위 부피 및 단위 입체각 당 에너지 (J/srm³)	r	· 북수묵 워자
ħ :2π로 규준화된 플랭크 상수 (Js)	â	· 다이 바창베
K : 규준화된 열전도율	з Т	· 인지 영양력
<i>k</i> : 파수 (1/m)	1	: 근도 (K)
<i>k</i> _ · 보 ス마 사수 (<i>k</i> ₂ = 1.38 × 10 ⁻²³ I/K)	v	: 포돈 군쪽도
κ_B . $\Xi = \Xi$ o + ($\kappa_B = 1.50 \times 10 \text{ J/K}$)		
* Corresponding Author, jinjs@cst.ac.kr	그리스문사	

© 2016 The Korean Society of Mechanical Engineers

두께 (m) 길이 (m) 밴드 수 m^2) 발열량 (W/m³) 반지름 (m) 터 (m/s)

:산란율 (s⁻¹) γ

: 불순물 농도 (cm⁻³) η : 열전도율 (W/mK) ĸ : 평균자유행로 (m) Λ : 이완시간 (s) τ : 각진동수 (rad/s) ω Ω : 입체각 (sr) 상첨자 : 평형상태 0 하첨자 а : 음향 포논 : *i* 번째 포논 밴드 i : *i* 와 *i* 번째 포논 밴드에 의한 물성 값 ij : 불순물 imp : 최대값 max : 광 포논 0 : 300 K 조건의 기준 값 ref : 포논 각진동수 Ø

1. 서 론

포논(phonon)은 결정체(crystal) 격자(lattice)의 열 을 전달하는 양자화된 진동인데, 반도체 및 절연 체(dielectric)와 같은 고체의 열을 전달하는 에너지 전달체(energy carrier)이다.⁽¹⁾ 따라서 고체 속 포논 전달 메커니즘을 잘 이해하면, 재료의 열전달 정 도를 공학적 목적에 맞게 제어할 수 있다. 이는 반도체 소자의 장기 신뢰성 확보를 위한 최적설계 및 고효율 열전(thermoelectrics) 재료 개발에 매우 유용하며,^(2,3) 이외에도 다양한 열 및 광학 관련 마 이크로장치 설계에 유용하게 활용될 수 있다.^(1,4)

고체 속 양자화된 진동인 포논의 주파수 스펙트 럼(spectrum) 범위는 수 Hz ~ 수 THz 로 매우 폭넓 게 분포한다.⁽⁴⁾ 이와 같은 폭넓은 포논의 스펙트럼 과 그리고 THz 정도의 초고주파 포논 모드(mode) 의 발생으로 인하여, 포논 전달 조절은 전자 (electron)나 포톤(photon)에 비해 매우 어렵다.⁽⁴⁾

포논 전달 조절을 위한 제어가능 요인을 이해하 기 위해, 열역학적 평형을 가정한 운동역학 이론 (kinetic theory)으로부터 에너지 전달체의 열전도율 (κ)을 정의하면, $\kappa = (Cv\Lambda)/3$ 으로 간단히 예측할 수 있다.⁽¹⁾ 여기서 C 및 v, Λ 는 각각 에너지 전달체의 비열(specific heat), 군속도(group velocity), 평균자유 행로(mean free path, MFP)를 의미한다.⁽¹⁾ 이로부터 포논의 열전달 능력은 C v A에 비례함을 알 수 있는데, 이중에서 C 및 v의 조정은 포논의 파동적 특성과 관련이 있어,⁽⁵⁾ 원자 수준의 조절 및 설계 가 필요하기 때문에 매우 어렵다. 반면, 포논의 Λ 는 결정체 격자의 서로 다른 주파수의 포논 모드 들 사이의 산란(scattering), 다른 종류의 에너지 전 달체와의 산란, 경계면 또는 고체 속 결점(defect), 불순물(impurity) 등과의 산란에 의해 결정된다.⁽¹⁾ 따라서 재료 속에 나노입자 및 불순물을 임의로 삽입하면, 고체 속 특정 주파수 대의 포논 산란 메커니즘에 변화를 초래하여, 재료의 열전달 특성 을 조정할 수 있다.^(3,6,7)

에너지 전달체 MFP 의 물리적 의미는 재료 속 에서 에너지 전달체가 얼마나 멀리 가는지를 의미 하며, 마이크로/나노 구조물 열전달은 시스템의 특 성길이(L_c)와 포논 ∧와 깊은 관련이 있다. L_c ≒ ∧ 이거나 L_c < Λ 인 경우, 열역학적 평형을 가정할 수 없는 비평형(non-equilibrium) 상태가 되어, 크기 효과(size effect)에 의해 포논 전달은 준-탄도성 (quasi-ballistic) 이라고 불리는 방식으로 전달되며, 경계(boundary) 산란이 중요해져, 결국 덩어리 (bulk) 상태의 열전도율보다 훨씬 작아짐이 알려져 있다.^(1,5) 이와 같은 열전달 해석은 볼츠만 수송방 정식(Boltzmann transport equation, BTE)으로 가능하 다.⁽¹⁾ 따라서 포논의 MFP 는 마이크로/나노장치 열전달 형태 및 포논 전달 조절에 매우 중요한 길 이 인자이며, 최근 재료 속 포논의 MFP를 실험적 으로 측정하는 방법에 대한 연구(&~10)가 진행되었 고, 여러 재료에 대한 포논의 MFP 스펙트럼의 열 전달 기여도에 대한 연구가 활발히 진행됐으 나,^(11~16) 지금까지의 포논 MFP 스펙트럼 열전달 기여도 관련 연구는 재료의 단순 박막이나 나노와 이어 형태에 대한 것이었다.(11~16)

본 연구에서는 공학적 응용을 목적으로, 단순 박막 형태가 아닌 실리콘 박막(Silicon-on-Insulator, SOI) 트랜지스터 작동 시, 전자와 포논 사이의 에 너지 전달로 발생하는 Joule 발열에 의한 포논 MFP 스펙트럼 열전달 기여도 특성을 파악하고자 한다.

고체 속의 포논 에너지는 무한히 반복되는 브라베 격자(Bravais lattice) 속에 널리 퍼져 분포한다. 이런 경우, 포논 에너지의 공간상 분포를 Fourier 변환을 통해 역격자(reciprocal lattice)로 변환시켜 해석하며,⁽¹⁾ 포논의 주파수와 파수(wave number)와의 관계를 나타 내는 분산관계(dispersion relation)을 얻을 수 있다. 포 논 분산관계는 음향 갈래(acoustic branch)와 광 갈래 (optical branch)로 이루어지고, 재료 속에서 각 갈래의 진행방향에 따라 1 개의 세로(longitudinal) 갈래와 축

112

퇴한(degenerate) 2 개의 가로(transverse) 갈래가 존재 한다.^(1,17,18) 즉, 1 개의 세로 음향갈래(LA), 2 개의 가로 음향갈래(TA), 1 개의 세로 광갈래(LO), 2 개의 가로 광갈래(TO)가 존재하며, 이와 같이 서로 다른 주파 수를 가지고 있는 포논 모드들 사이의 상호작용은 군속도의 진동수 의존성인 이완시간과 분산 (dispersion) 효과와 분극(polarization) 효과를 통해 고 려할 수 있다. Narumanchi 등^(17,18)이 제안한 BTE 근 간의 full phonon dispersion (FPD) 모델은 이들 효과를 고려하기 위해 포논의 갈래를 각각의 진동수 범위에 서 균등하게 분할하여 밴드(band)로 나누고, 각 밴드 내 포논 모드의 물성은 그 주파수 범위의 평균이라 고 가정하여 분산 및 분극 효과를 고려한 모델이 다.(17,18)

본 연구에서는 포논의 분산관계를 따르는 주파 수 의존성이 고려된 FPD 모델^(17,18)을 이용하여 SOI 트랜지스터의 실리콘 박막 두께 변화에 따른 포논 MFP 스펙트럼 열전달 기여도 특성을 살폈다. 또한, 박막 두께의 길이 방향과 수직 방향에 따른 비등방성 열전달을 수치해석 방법으로 해석했다. 본 연구결과는 향후 박막 트랜지스터에 대한 고효 율 열소산 설계전략 및 열 제어설계에 활용될 수 있다.

2. 해석모델 및 해석방법

2.1 해석모델: Full Phonon Dispersion 모델 서론에서 언급했듯이 포논 전달 특성을 정확히 해 석하기 위해서는 포논 분산관계를 고려한 해석이 필요하며, 포논과 포논 사이의 산란에 의한 에너 지 전달을 모사하기 위해서는 포논의 분산 및 분 극 효과가 고려돼야 한다.⁽¹⁷⁾ 본 연구에서는 300 K 에서 실리콘의 [001] 방향에 대한 포논 분산관계⁽¹⁹⁾ 을 고려했다. 엄밀히 말하면, 포논 분산관계는 격 자 방향에 따라 다르지만, 본 연구에서는 Narumanchi 등^(17,18)이 적용한 가정인 등방성 (isotropic) 포논 분산관계를 가정했다. 상기 포논의 분산과 분극 효과를 포함하기 위해서 포논 분산관 계의 각 갈래의 전체 진동수 범위를 균등하게 분 할하여, 포논 음향 갈래에 대해서는 6 등분^(17,18)하 였고, 광 갈래의 경우는 그 진동수 범위가 약 2 THz 로 음향 갈래 전체 진동수 범위(약 12 THz) 에 비해 상대적으로 좁은 범위이므로 하나의 밴드 로 처리했다.^(17,18) 이에 대한 자세한 해석방법은 Narumanchi 등^(17,18)에 언급되어 있으며, 각 갈래의 밴드 분할 개념도를 정리하여 Fig. 1 에 나타냈다. 이완 시간 근사(relaxation time approximation)를



Fig. 1 Schematics for phonon dispersion relation in the [001] direction in silicon at 300 K⁽¹⁹⁾showing branches divided by equal frequency range of band (TO: Transverse Optical; LO: Longitudinal Optical; LA: Longitudinal Acoustic; TA: Transverse Acoustic)

적용한 BTE 근간의 포논 FPD 모델^(17,18)은 음향 갈래(하첨자 *i*)와 광 갈래(하첨자 *o*)의 단위 부피 및 단위 입체각 당 에너지(*e*") 변화율을 다음과 같이 모델링 하다.^(17,18,21)

$$\frac{\partial e_i''}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\nu_i \hat{s} e_i'' \right) = \left(e_i^0 - e'' \right) \left(\gamma_{ii} + \gamma_{\text{imp},i} \right) + \sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{N_{\text{hands}}} \left\{ \left(\frac{1}{4\pi} \int_{T_{\text{ref}}}^{T_{ij}} C_i dT - e'' \right) \gamma_{ij} \right\}$$

$$\tag{1}$$

$$\frac{\partial e_o}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N_{\text{hands}}-1} \left(\int_{T_{ref}}^{T_{ef}} C_o dT - e_o \right) \gamma_{oj} + q_{vol}$$
(2)

여기서 q_{vol} 은 Joule 가열에 의한 발열량을 나타내 며, N_{bands} = 13 (Fig.1 참조: 6 (LA 밴드 수) + 6 (TA 밴 드 수) + 1 (광포논 밴드 수)) 이다. 포논 MFP 와 비슷한 특성길이 영역에서는 열역학적 온도 (thermodynamic temperature)를 정의할 수 없으나,⁽¹⁾ 포논의 분산관계의 진동수 범위를 균등⁽¹⁷⁾하게 나 눈 *i* 번째 밴드의 포논 모드에 대한 단위 부피당, 단위 입체각 당 에너지 *e*_i"를 정의할 수 있다.⁽¹⁷⁾ 이를 이용하여, *i* 번째 밴드의 포논에 의한 열유속 (heat flux)은 다음 식으로 계산할 수 있고,⁽¹⁷⁾

$$\bar{q}_i = \int_{4\pi} v_i \hat{s} e_i'' d\Omega \tag{3}$$

열유속과 열전도율의 관계는 비례관계이므로, 열 역학적 온도가 정의되지 않는 비평형 상태에 대 해, *i* 번째 밴드 포논의 규준화된 열전도율 *K_i* 는 다음의 관계식을 이용하여 구할 수 있다.

	Group velocity, v _i (m/s)		Specific heat, <i>C_i</i> (J/m ³ K)	
Band (i)	LA	ТА	LA	ТА
1	9147.8	5329.6	582.0	314.5
2	8559.9	5523.3	4497.6	2071.1
3	7459.1	4976.7	15054.3	5424.7
4	6503.8	4122.1	35587.3	18289.9
5	5398.2	2926.7	79411.9	55692.0
6	3907.5	1315.2	184226.8	580061.4

 Table 1 Phonon group velocity and specific heat^(17,18)

$$K_i = \bar{q}_i / \sum_{i=1}^{N_{band}} \bar{q}_i$$
(4)

또한, 포논 밴드 별 MFP (Λ_i) 는 $\Lambda = v\tau$ 의 관계식⁽¹⁾ 을 이용했다. 여기서 포논 이완 시간(relaxation time) τ 와 산란율(scattering rate) γ 의 관계는 $\tau = 1/\gamma$ 이며, i 번째 포논 밴드와 j 번째 포논 밴드와의 산란율 을 γ_{ij} 로 표현하면 Λ_i 에 대해 다음의 관계식을 얻 을 수 있다.

$$\Lambda_{i} = \nu_{i} \left[\sum_{j=1}^{N_{bond}} (\gamma_{ij} + \gamma_{ii}) + \gamma_{imp,i} \right]$$
(5)

여기서 $\gamma_{imp,i}$ 는 *i* 번째 밴드 포논 모드와 불순물, 즉, 붕소와의 산란율이다.

2.2 해석조건 및 방법

본 연구에서 해석한 SOI 트랜지스터 도식 및 경계조건을 Fig. 2 에 나타냈다. SOI 트랜지스터 도 식은 Goodson 등⁽²⁰⁾이 실험한 조건과 동일하다. 이 산화규소(SiO₂) 두께 359 nm 위에 붕소(Boron) 농 도 6 × 10¹⁷ cm⁻³으로 도핑(doping)된 Si-층이 있다. Si-층의 두께 변화는 41 nm, 78 nm, 177 nm 를 고려 했다.^(20,22) 트랜지스터 윗면은 확산반사(diffuse reflection)의 단열 면으로 가정했으며, 나머지 면들 은 온도 303 K 로 유지되면서 Joule 가열에 의한 열이 소산되도록 했다. 트랜지스터가 작동하면서 Si 박막 내 발생하는 Joule 가열은 게이트(gate)의 드레인(drain) 영역 쪽에서 발생하며,⁽²⁰⁻²²⁾ 발열 부 의 크기는 10 × 10 nm²으로 가정했고,⁽²²⁾ 발열량 은 $q_{vol} = 6 \times 10^{17}$ W/m³으로 계산했다.^(18,21)

수치해석은 유한체적법(finite volume method)을 적 용했고, 직교 좌표계는 실리콘 박막 두께 41 nm, 78 nm, 177 nm 각각에 대해 130 x 64, 130 x 70, 130 x



Fig. 2 Two-dimensional computational domain of Siliconon-Insulator (SOI) transistor and simulation conditions^(20,22)

76 개의 격자(grid)를 사용했으며, 원자의 진동에 의 한 포논 전달을 계산하는 구면 좌표계는 16 x 4 개 의 격자(grid)를 적용하여, 0.1%의 수렴 오차를 얻었 다. Fig. 2 에서 Si-층은 FPD 모델로 해석한 반면, 이 산화규소 층은 포논의 MFP 가 대략 1 nm 로 극히 작으므로 Fourier 법칙을 적용했다. Si-SiO₂ 경계면 은 완전 확산 면으로 가정했고, 이 경계면에 입사 한 포논 에너지의 일부분은 Si-층으로 반사되며, 일부는 SiO₂ 층으로 투과된다. 이 SiO₂ 층으로 투과되 는 포논 에너지는 확산 불일치(diffuse mismatch) 모델⁽²⁴⁾ 을 적용했다.

2.3 포논 전달 물성치

FPD 모델을 해석하기 위해서는 포논 분산관계에 서 *i* 번째 밴드의 포논 전달 특성을 대표하는 군속 도 *v_i* 와 비열 *C_i* 에 대한 정보가 필요한데, 본 연구 에서는 300 K 에서 Si [001]방향의 분산관계⁽¹⁹⁾를 이 용하여 *v_i* 는 *v_i* = ∂*ω_i* / ∂k 로 구할 수 있으며,⁽¹⁾ 음향 갈래와 광갈래의 비열 *C_i* 와 *C_o* 는 온도 변화에 대 한 음향갈래와 광갈래 각각의 포논 에너지 변화로 부터 구할 수 있는데, 다음과 같이 표현되며,⁽¹⁷⁾

$$C_{i} = \int_{\Delta k} \frac{\hbar \omega_{i}^{2} k^{2} e^{\hbar \omega_{i}/k_{B}T} dk}{2\pi^{2} k_{B}T^{2} \left(e^{\hbar \omega_{i}/k_{B}T} - 1\right)^{2}}, \quad C_{o} = 3 \frac{k_{B}}{V} \left(\frac{\hbar \omega_{o}}{k_{B}T}\right)^{2} \frac{e^{\hbar \omega_{o}/k_{B}T}}{\left(e^{\hbar \omega_{o}/k_{B}T} - 1\right)^{2}},$$
(6)

Table 1 에 각 밴드의 포논 모드에 해당되는 v_i 와 $C_i =$ 나타냈다.^(17,18) 동일한 밴드의 포논 모드 사 이의 산란율(scattering rate) γ_{ii} 와 *i* 번째 밴드의 포 논 모드와 *j* 번째 밴드 포논 모드 사이의 산란율 $\gamma_{ij} =$ 구하기 위한 이완 시간 τ_{ij} 와 τ_{ii} 는 섭동이론 (perturbation theory)으로 구할 수 있는데, Narumanchi 등⁽¹⁸⁾이 계산한 값을 적용했다.

i 번째 밴드 포논 모드와 불순물인 붕소와의 산 란율(*y*_{imp,i})은 *y*_{imp,i} = ασ_iηv_i로 계산했는데,⁽²⁴⁾ 여기서



Fig. 3 Comparison of the thermal conductivity accumulation distribution for silicon films of various thicknesses as a function of phonon MFP at 300 K (Results of Wang et al.⁽¹⁵⁾: L = 4.34 nm, 13.03 nm, 130.3 nm, 1303 nm, and Bulk; Present results: L = 70 nm and 130 nm)

 α 는 실험값을 이용한 곡선 접합(curve fitting)으로 구한 상수이며, $\alpha = 50$ 이고, $(^{17,22})$ σ_i 는 다음 식으로 구할 수 있다. $(^{17,22,25})$

$$\sigma_i = \pi r^2 \left[\frac{\left(rk_i \right)^4}{\left(rk_i \right)^4 + 1} \right] \tag{7}$$

여기서 r 는 불순물(붕소)의 원자 반지름이며, k_i 는 i번째 밴드 포논 모드의 파수이다.

3. 해석결과 및 고찰

3.1 실리콘 박막 MFP 스펙트럼 별 열전달 기여 도 예측

Wang 등⁽¹⁵⁾은 제 1 원리(first principle) 기법과 격 자운동(lattice dynamics) 기법을 통해 80-800 K 온 도범위에서 Si 박막 여러 두께에 대한 포논 MFP 스펙트럼의 두께방향(in-plane) 열전달 기여도를 계 산했다. 본 논문의 저자(J. S. Jin)는 FPD 모델을 개 발하여, 실험 결과와 비교 검증한 바 있는데.(21~23) 본 연구에서 제시한 방법을 검증하기 위해, Fig. 3 에 Jin⁽²⁶⁾이 수행한 방법으로 FPD 모델을 이용한 Si 두께 L = 70 nm 와 130 nm 에 대한 포논 MFP 스 펙트럼 두께방향 열전달 기여도를 계산하여, Wang 등⁽¹⁵⁾의 결과와 비교했다. Fig. 3 에서 보듯이 L = 130 nm 경우의 FPD 해석결과가 수십 nm 의 Λ 범 위를 제외한 $\Lambda = 100 \text{ nm}$ 이상의 영역에서는 Wang 등⁽¹⁵⁾의 결과와 잘 일치함을 알 수 있다. 수십 nm 범위의 포논 MFP 열전달 기여도가 Wang 등⁽¹⁵⁾의 결과와 다소 차이가 있는데, 그 이유는 수십 nm 이하의 MFP 는 주로 포논-포논 산란으로 결정되



Fig. 4 Room-temperature normalized thermal conductivity of three kinds of silicon films as a function of phonon mean free path of: (a) In-plane and (b) Out-of-plane

는데, FPD 모델의 경우, 포논-포논 산란율의 주파 수 의존성을 "밴드" 주파수 범위에서 평균화 했 기 때문이다. 또한, *L* = 70 nm 에 대한 해석결과는 Wang 등⁽¹⁵⁾의 *L* = 13.03 nm 와 *L* = 130.3 nm 결과 사이에 위치한다. Wang 등⁽¹⁵⁾의 해석방법이 매우 고비용의 계산 결과임을 고려하면, 본 FPD 모델 해석방법은 타당하다고 볼 수 있다.

현재 FPD 모델은 격자 등방성 가정의 덩어리 (bulk)의 포논 분산관계를 사용했고, 양자효과 (quantum effects)를 고려할 수 없다는 제한이 있어, 포논의 파장 길이 범위가 1-5 nm 임을⁽²⁷⁾ 고려하 여, 본 연구에서는 40 nm 이하의 초박막(ultra-thin film)에 대해서는 고려하지 않았다.

3.2 SOI 트랜지스터의 Si 박막 포논 MFP 열전달 기여도 해석 결과

Fig. 4 는 Si-층의 두께 방향(Fig. 4(a))과 두께에

수직한 방향(Fig. 4(b))에 대한 규준화된 열전도율 의 누적된 값을 계산한 결과인데, 두께 변화에 대 한 포논 MFP 스펙트럼 별 열전달 기여도 변화는 두께에 수직한 방향의 경우에 두드러지게 나타남 을 알 수 있다. 예를 들어, 누적 K 가 95%와 50% 정도에 대해서 Fig. 4(a)와 4(b)를 비교하면, Si-층 두께가 41 nm, 78 nm, 177 nm 에 대한 누적 K 가 95% 되는 Λ는 Fig. 4(a) 경우인 두께 방향의 포논 전달에 대해서는 각각 ~130 nm, ~150 nm, ~ 170 nm 정도로 그 변화가 크지 않으나, 두께에 수직한 방 향의 포논 전달(Fig. 4(b)) 경우는 Λ가 각각 ~0.5 μm, ~2 μm, ~5 μm 정도로 두께 변화에 대한 포논 MFP 기여도의 변화가 크다. 이러한 변화는 누적 K 가 ~50% 정도에 대해서 Fig. 4(a)와 4(b)를 비교 하면 더욱 뚜렷하게 알 수 있다. 이는 두께에 수 직한 방향의 포논(열) 전도는 포논-경계 산란 영향 을 많이 받기 때문이며, 따라서 Si 두께 변화에 따른 포논 MFP 스펙트럼 별 열전달 기여도 변화 가 크게 된다. 한편, Fig. 4(a)와 4(b)에서 100 nm < Λ < 200 nm 근처에서 K 기여도가 급격히 커지는데, 이 MFP 범위의 포논 전달이 두드러짐을 알 수 있 다. Si-층 두께 변화에 따라 이 두드러지는 정도 또한 두께 방향보다는 두께에 수직방향인 포논 전 달 경우가 큰데, L = 41 nm, 78 nm, 177 nm 각각에 대 해서 20%, 25%, 30% 이상씩 커진다. 또한, 두께 수 직방향 포논 전달의 경우 Λ = 200 nm 이상의 MFP 의 열전도율 기여도가 거의 없음을 알 수 있으며, 누적 K 기여도 50%가 되는 Λ는 Si-층 두께 L=41 nm, 78 nm, 177 nm 에 대해서 각각 30 nm, 50 nm, 100 nm 정도이며, 그 크기가 박막 두께 정도임을 알 수 있다. 따라서 박막 트랜지스터에서 박막 두 께 정도 이하에 해당하는 포논 MFP 에 의한 열전 달을 무시할 수 없음을 알 수 있다.

4. 결 론

포논의 MFP 는 마이크로/나노구조물 내 열전달 형태를 결정하는 중요한 길이 인자이며, 열전달 정도를 조절할 수 있는 중요한 정보를 포논 MFP 스펙트럼 열전달 기여도로부터 얻을 수 있다. 본 연구에서는 포논 MFP 스펙트럼 열전달 기여도를 단순한 박막 재료가 아닌, 실제 마이크로시스템인 SOI 트랜지스터에 대해서 수치해석 했다. 기존의 원자단위의 고비용 계산이 아닌, full phonon dispersion 모델을 이용한 실리콘 박막의 비등방성 열전달 특성 해석법을 제시했고, 이를 통해, 박막 두께 변화에 따른 포논 MFP 스펙트럼 열전달 기 여도 특성을 분석했다. 본 연구결과는 향후 박막 트랜지스터에 대한 고효율 열소산(heat dissipation) 설계전략 및 열 제어설계에 활용될 수 있다.

참고문헌

(References)

- Tien, C. L., Majumdar, A. and Gerner, F. M., 1998, MICROSCALE ENERGY TRANSPORT, Taylor & Francis, Washington D. C., pp. 3~94.
- (2) Kim, S. I., Lee, K. H., Mun, H. A, Kim, H. S., Hwang, S. W., Roh, J. W., Yang, D. J., Shin, W. H., Li, X. S., Lee, Y. H., Snyder, G. J. and Kim, S. W., 2015, "Dense Dislocation Arrays Embedded in Grain Boundaries for High-performance Bulk Thermoselect-rics," *Science*, Vol. 348, No. 6230, pp. 109~114.
- (3) Kim, W., Zide, J., Gossard, A., Klenov, D., Stemmer, S., Shakouri, A. and Majumdar, A, 2006, "Thermal Conductivity Reduction and Thermoelectric Figure of Merit Increase by Embedding Nanoparticles in Crystalline Semiconductors," *Physical Review Letters*, Vol. 96, No. 4, Paper Number 045901.
- (4) Maldovan, M., 2001, "Sound and Heat Revolutions in Phononics," *Nature*, Vol. 503, No. 7475, pp. 209~217.
- (5) Zhang, Z. M., 2007, *Nano/Microscale Heat Transfer*, Mc Graw Hill, New York, pp. 101~192.
- (6) Maldovan, M., 2013, "Narrow Low-Frequency Spectrum and Heat Management by Thermocrystals," *Physical Review Letters*, Vol. 110, No. 2, Paper Number 025902.
- (7) Estreicher, S. K., Gibbons, T. M., and Bebek, M. B., 2015, "Thermal Phonons and Defects in Semiconductors; The Physical Reason Why Defects Reduce Heat Flow, and How to Control It," *Journal of Applied Physics*, Vol. 117, No. 11, Paper Number 112801.
- (8) Minnich, A. J., Johnson, J. A., Schmidt, A. J., Esfarjani, K., Dresselhaus, M. S., Nelson, K. A., and Chen, G. 2011, "Thermal Conductivity Spectroscopy Technique to Measure Phonon Mean Free Paths," *Physical Review Letters*, Vol. 107, No. 9, Paper Number 095901.
- (9) Hu, Y., Zeng, L., Minnich, A. J., Dresselhaus, M. S., and Chen, G., 2015, "Spectral Mapping of Thermal Conductivity Through Nanoscale Ballistic Transport," *Nature Nanotechnology*, Vol. 10, No. 8, pp. 701~706.
- (10) Minnich, A. J., 2012, "Determining Phonon Mean Free Paths from Observations of Quasiballistic Thermal Transport," *Physical Review Letters*, Vol. 109, No. 20, Paper Number 205901.
- (11) Regner, K. T., Sellan, D. P., Su, Z., Amon, C. H., McGaughey, A. J. H. and Malen, J. A., 2013, "Broadband Phonon Mean Free Path Contributions to Thermal Conductivity Measured Using Frequency Domain Thermoreflectance," *Nature Communications*, Vol. 4,

실리콘 박막 트랜지스터 내 포논 평균자유행로 스펙트럼 비등방성 열전도 특성에 대한 수치적 연구 117

Paper Number 1640.

- (12) Yang, F. and Dames, C., 2013, "Mean Free Path Spectra as a Tool to Understand Thermal Conductivity in Bulk and Nanostructures," *Physical Review B*, Vol. 87, No. 3, Paper Number 035437.
- (13) Xie, G, Guo, Y., Wei, X., Zhang, K., Sun, L., Zhong, J., Zhang, G and Zhang, Y.-W., 2014, "Phonon Mean Free Path Spectrum and Thermal Conductivity for Si_{1-x}Ge_x Nanowires," *Applied Physics Letters*, Vol. 104, No. 23, Paper Number 233901.
- (14) Ramu, A. T. and Ma, Y., 2014, "An Enhanced Fourier Law Derivable from the Boltzmann Transport Equation and a Sample Application in Determining the Mean-free Path of Nondiffusive Phonon Modes," *Journal of Applied Physics*, Vol. 116, No. 9, Paper Number 093501.
- (15) Wang, X. and Huang, B., 2014, "Computational Study of In-Plane Phonon Transport in Si Thin Films," *Scientific Reports*, Vol. 4, Paper Number 6399.
- (16) Cuffe, J., Eliason, J. K., Maznev, A. A., Collins, K. C., Johnson, J. A., Shchepetov, A., Prunnila, M., Ahopelto, J., Torres, C. M. S., Chen, G and Nelson, K. A., 2015, "Reconstructing Phonon Mean-free-path Contributions to Thermal Conductivity Using Nanoscale Membranes," *Physical Review B*, Vol. 91, No. 24, Paper Number 245423.
- (17) Narumanchi, S. V. J., Murthy, J. Y. and Amon, C. H., 2004, "Submicron Heat Transfer Model in Silicon Accounting for Phonon Dispersion and Polarization," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 126, No. 6, pp. 946~955.
- (18) Narumanchi, S. V. J., Murthy, J. Y. and Amon, C. H., 2005, "Comparison of Different Phonon Transport Models for Predicting Heat Conduction in Silicon-on-insulator Transistors," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 127, No. 7, pp. 713~723.
- (19) Brockhouse, B. N., 1959, "Lattice Vibrations in Silicon and Germanium," *Physical Review Letters*, Vol. 2, No. 6,

pp. 256~258.

- (20) Goodson, K. E., Flik, M. I., Su, L. T. and Antoniadis, D. A., 1995, "Prediction and Measurement of Temperature Fields in Silicon-on-Insulator Electronic Circuits," *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol. 117, No. 3, pp. 574~581.
- (21) Jin, J. S. and Lee, J. S., 2007, "Electron-Phonon Interaction Model and Prediction of Thermal Energy Transport in SOI Transistor," *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol. 7, No. 11, pp. 4094~4100.
- (22) Jin, J. S. and Lee, J. S., 2009, "Electron-Phonon Interaction Model and Its Application to Thermal Transport Simulation during ESD Event in NMOS Transistor," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 131, No. 9, Paper Number 092401.
- (23) Jin, J. S. and Lee, J. S., 2009, "Effect of Joule Heating Variation on Phonon Heat Flow in Thin Film Transistor," *Trans. Korean Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 33, No. 10, pp. 820~826.
- (24) Swartz, E. T. and Pohl, R. O., 1989, "Thermal Boundary Resistance," *Reviews of Modern Physics*, Vol. 61, No. 3, pp. 605~668.
- (25) Mazumder, S. and Majumdar, A., 2001, "Monte Carlo Study of Phonon Transport in Solid Thin Films Including Dispersion and Polarization," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 123, No. 4, pp. 749~759.
- (26) Jin, J. S., 2014, "Prediction of Phonon and Electron Contributions to Thermal Conduction in doped Silicon Films," *Journal of Mechanical Science and Technology*, Vol. 28, No. 6, pp. 2287~2292.
- (27) Cahill, D. G., Goodson, K. E. and Majumdar, A, 2002, "Thermometry and Thermal Transport in Micro_Nanoscale Solid-State Devices and Structures," *ASME Journal of Heat Transfer*, Vol. 124, No. 2, pp. 223~241.